安全数据表 / SAFETY DATA SHEET (SDS)

符合法规 (EC) 1907/2006 (REACH) 附件 II——法规 (EU) 2020/878

日期： 10.11.2026 | 版本： 8 | ZH

己烷

hexane

CAS 110-54-3

C_6H_{14} | EC 203-777-6

摩尔质量	LOGP
86.18	3.9

危险分类（GHS/CLP）



危险

H225 | H361f | H304 | H372 | H315 | H336 | H411

危害类别范围仅限于协调分类（*CLP 附件 VI*）；协调条目之外的类别可能需要供应商自我分类（*CLP 第 4(3) 条*）——请核对供应商安全数据表。

1. 物质/混合物和公司/企业的标识

1.1 物质名称	己烷
1.1 IUPAC名称	hexane
1.1 CAS号	110-54-3
1.1 EC号	203-777-6
1.1 PubChem CID	8058
1.1 InChIKey	VLKZOEOYAKHREP-UHFFFAOYSA-N
1.1 SMILES	CCCCCC
1.1 分子式	C_6H_{14} [7]
1.1 摩尔质量	86.18 g/mol [7]
1.1 精确质量	86.1096 Da [7]

1.2 用途

用于实验室和研究目的。未经适当授权，不得用于食品、药品或化妆品的生产。

1.3 供应商信息

REFERENCE COPY — NO SUPPLIER DETAILS — NOT FOR DISTRIBUTION	Supplier details are not included in this reference copy. The supplier placing the substance on the market must complete this section and remains responsible for the sheet under REACH. MolGod.org prepares documentation and is not the supplier of this substance.

1.4 应急电话号码

应急电话	112 (EU-wide emergency number)

Contact the poison centre designated in the country of placing on the market (CLP Art. 45).

2. 危险性识别

GHS:



个人防护装备：



禁止事项：



危险

危险说明（H） [3][4][12]

H225	高度易燃液体和蒸气
H361f	怀疑对生育能力造成伤害
H304	吞咽并进入呼吸道可能致命
H336	可引起昏睡或眩晕
H372	长期或反复接触会对器官造成伤害(说明已知的所有受影响器官)(说明接触途径——如已确证无其他接触途径造成这一危害)
H315	造成皮肤刺激
H411	对水生生物有毒并具有长期持续影响

防范说明（P） [3][4][12]

P201	使用前取得专用说明。
P202	在阅读并明了所有安全措施前切勿搬动。
P210	远离热源、热表面、火花、明火和其他点火源。禁止吸烟。
P233	保持容器密闭。
P240	货箱和装载设备接地并等势联接。
P260	不要吸入粉尘/烟/气体/气雾/蒸气/喷雾。
P264	作业后彻底清洗手部[和……]。
P271	只能在室外或充分通风的情况下使用。
P273	避免释放到环境中。
P280	戴防护手套/穿防护服/戴防护眼罩/戴防护面具/戴听力保护装置……
P301+P310	如误吞咽：：立即呼叫中毒急救中心/医生/……
P302+P352	如皮肤沾染：：用水充分清洗/……
P303+P361+P353	如皮肤(或头发)沾染：：立即脱掉所有沾染的衣服。；用水清洗患处【或淋浴】
P304+P340	如误吸入：：将人转移到空气新鲜处，保持呼吸舒适体位。
P308+P313	如已接触或有疑虑：：求医/就诊。
P312	如感觉不适，呼叫中毒急救中心/医生/……
P314	如感觉不适，须求医/就诊。
P331	不得诱导呕吐。
P332+P313	如发生皮肤刺激：：求医/就诊。
P370+P378	如起火：：使用……灭火。
P391	收集溢出物。
P403+P235	存放于通风良好处。：保持低温。

WORKING DRAFT · 工作草案

P403+P233	存放于通风良好处。：保持容器密闭。
P405	存放处须加锁。
P501	处置内装物/容器……

注意：**CMR** 物质 — 禁止安排孕妇和哺乳期妇女从事有害健康的工作（波兰劳动法第**176**条第**1**款；**2017**年**4**月**3**日部长会议条例，**2017**年法律公报第**796**号）。 [17][18]

危害类别范围仅限于协调分类（**CLP** 附件 **VI**）；协调条目之外的类别可能需要供应商自我分类（**CLP** 第 **4(3)** 条）——请核对供应商安全数据表。

3. 成分/组成信息

物质类型	纯物质
CAS号	110-54-3
EC号	203-777-6
分子式	C_6H_{14}
浓度	≥99% (典型试剂级纯度 — 须由供应商规格确认)
Clp index no	601-037-00-0

4. 急救措施



吸入

将受害者移至新鲜空气处。保持休息。如无呼吸：进行人工呼吸（仅限合格人员）。 [1][2][15]

皮肤接触

脱去受污染的衣物。用肥皂和水冲洗皮肤（至少15分钟）。 [1][2][15]

眼睛接触

用流动水冲洗眼睛（至少15分钟）。如可能，取出隐形眼镜。如刺激持续——咨询眼科医生。 [1][2][15]

食入

Do NOT induce vomiting (unless directed by a physician). Rinse mouth with water. Never give anything by mouth to an unconscious person. Emergency number: 112 (EU-wide). Contact the poison centre designated in your country (CLP Art. 45). [1][2][15]

症状和影响

咳嗽、呼吸困难、头痛、头晕; 皮肤发红和刺激. [3][12]

给医生的建议

需要核实

应急电话： 紧急情况： **112 (EU-wide). Poison centre: as designated in the country of placing on the market (CLP Art. 45).**

5. 消防措施

适用的灭火剂	抗醇泡沫、二氧化碳（CO_2）、干粉、喷雾状水/水雾。 [1][2][15]
不合适的灭火介质	密集水柱（会飞溅并扩散漂浮在水面上的燃烧液体）。 [1][2][15]
特殊危害	热分解产物： CO, CO2. [16]
消防员建议	使用自给式呼吸器（SCBA）。全套防护服。 [1][2][15]
闪点	-22°C [7]
自燃温度	225°C [7]

6. 泄漏应急处理

个人预防措施	使用个人防护装备（见第8节）。避免吸入蒸气。 [1][2][15]
环境预防措施	防止进入下水道、地下水和地表水。 [1][2][15]
围堵和清理方法	用围堤围堵泄漏物。用惰性材料（砂、蛭石、硅藻土）吸附。收集至密封、标记的容器中。请勿排入下水道。 消除点火源；使用防火花工具。 [1][2][15]
相关章节	8; 13

WORKING DRAFT 工作草案

7. 操作处置与储存

预防措施	在通风橱或通风良好的地方工作。工作区域禁止进食、饮水或吸烟。 [1][2][15]
储存温度	在室温（15-25°C）下储存，或按标签指示储存。 [1][2][15]
含水量	在干燥处储存（<60% RH）。 [1][2][15]
光	避免阳光直射。 [1][2][15]
禁配物	强氧化剂, 点火源、明火. [16]

8. 暴露控制/个人防护

8.1 控制参数

NDS（波兰）	NDS = 72 mg/m³ (TWA) — Rozp. MRiPS Dz.U.2024 poz.1017 [26]
OEL（欧盟）	欧盟职业接触限值（OEL）未在可用数据集中验证——请检查IOELV/BOELV指令；不要假定无值。
DNEL	无可用数据。
PNEC	无可用数据。

8.2 个人防护装备（PPE） [5][6][19]



9. 物理和化学性质

性质（第**9.1**项）	值	来源
物态	液体	
颜色	液体 [7]	
气味	类似汽油的气味 [7]	
pH值（**1%**水溶液）	不适用	
熔点	-95.32°C [8] [7][24]	
沸点	68.7771°C [8] [7][24]	
闪点	-22°C (experimental data) [7]	
易燃性	Flam. Liq. 2 (H225) [3][12]	
上下爆炸极限/易燃极限	1–8.9 % obj. [24]	
密度（**20°C**）	0.6595 g/cm³ [7][24]	
蒸气压	15.999 kPa (120 mmHg, 20°C) [7][24]	
相对蒸气密度	2.97 [23]	
动力黏度	0.377 mPa·s [7]	
运动黏度	无可用数据。	

WORKING DRAFT 工作草稿

性质（第**9.1**项）	值	来源
折射率 **nD²⁰**	1.3727 (experimental data) [7]	
自燃温度	225°C [7]	
分解温度	不适用	
表面张力	17.89 mN/m [9]	
水溶性	0.013 g/L, 20°C [7]	
颗粒特征	不适用 (REACH 9.1(r))	
辛醇－水分配系数（对数值）	3.9 [25]	
摩尔质量	86.18 g/mol [7]	
分子式	C_6H_{14} [7]	
利平斯基五规则（**RO5**）	**PASS**	

Where a property above reads "No data available", no measured value was found in the public sources consulted for this substance. The property has not been determined by MolGod.org and no value is inferred. "Not applicable" means the property has no meaning for this substance in the form supplied.

10. 稳定性和反应性

反应性	在正常储存和使用条件下稳定。
化学稳定性	在推荐条件下热稳定。
危险反应	正常条件下无已知危险反应。
应避免的条件	高温、直射阳光、湿气。
禁配物	强氧化剂，点火源、明火.
分解产物	热分解产物： CO, CO2.

11. 毒理学信息

LD50（经口）	25000 mg/kg (大鼠) [10]
LD50（经皮）	无可用数据。
LC50（吸入）	LC50 169000 mg/m3 (大鼠) [11][12]
皮肤刺激性	第2类 — 皮肤刺激。
眼睛刺激性	该危害未分类（超出 CLP 附件 VI 协调分类的范围；请核实供应商的自我分类） [3][12]
致敏性	该危害未分类（超出 CLP 附件 VI 协调分类的范围；请核实供应商的自我分类） [3][12]
致突变性	该危害未分类（超出 CLP 附件 VI 协调分类的范围；请核实供应商的自我分类） [3][12]
致癌性	该危害未分类（超出 CLP 附件 VI 协调分类的范围；请核实供应商的自我分类） [3][12]
IARC分类（致癌性）	该CAS号无单独的IARC专著——这并不确认无致癌性（参见第2节CLP/GHS分类）。
生殖毒性	类别 2（协调分类，CLP 附件 VI）。
STOT——单次暴露	第3类（H336）：可引起昏睡或眩晕。 [3][12]
STOT——重复暴露	第1类（H372）：长期或反复接触会对器官造成伤害。 [3][12]
吸入危害	第1类（H304）：吞咽并进入呼吸道可能致命。 [3][12]

WORKING DRAFT 工作草案

12. 生态学信息

水生毒性	协调分类（CLP 附件 VI）：H411——对水生生物有毒并具有长期持续影响（水生环境慢性2类）. LC_{50} (鱼): 2.5 mg/L (Pimephales promelas, 96 h) [22]
持久性/生物降解性	无可用数据。
生物累积性	log Kow = 3.9。生物累积潜力低（log Kow < 4.5 — 依据 ECHA 指南 R.11 的 PBT/vPvB 筛查标准）。 [20][21]
土壤中的迁移性	无可用数据。
PBT/vPvB评估	数据不足以评估PBT/vPvB。
内分泌干扰特性	无信息。

13. 废物处置

处置方法	根据国家和地方法规，交由有资质的承包商进行处置。不得排入下水道。
废物代码（**EWC**）	16 05 06* — 实验室和分析用化学品（例如化学试剂）含有危险物质。需要验证 EWC 代码。 [14]
包装	清洁过的包装可回收。受污染的包装必须作为危险废物处理。

14. 运输信息



第3类——易燃液体

UN编号	UN 1208 [13]
正式运输名称	Hexanes [13]
运输危险类别	3 [13]
包装组	II [13]
环境危害	CLP 分类（H411）表明存在水生环境危害 — 可能需要海洋污染物标记；按 ADR 2.2.9 / IMDG 标准确认 [3]
特殊预防措施	按分配的类别（ADR/IMDG/IATA）作为危险货物处理；采取该类别相应的预防措施。
CN/HS编码	CN/HS 编码：需在 Eurostat 组合税则中核实。
备注	运输分类依据 ADR / 联合国示范条例（UN 编号、类别和包装组见上）。请核实发货之日适用的 ADR/IMDG/IATA 版本。 [13]
环境危害（标记：鱼和树）	是

15. 法规信息

SVHC状态	未对照可用数据集核实 SVHC 状态 — 请查阅最新的 ECHA 候选清单；请勿假定不存在。 [1]
REACH 附件 **XIV**	未对照 ECHA 授权清单进行核实 — 请查阅 REACH 附件 XIV。 [1]
REACH 附件 **XVII**	在现有附件XVII数据集中未确认——在投放市场前请根据当前ECHA清单验证；不要假设无限制。 [1]

16. 其他信息

分类的法律地位：根据 CLP 附件 VI 协调 — 法规 (EC) No 1272/2008（截至签发日期）。生效日期晚于 10.11.2026 因尚未生效而被省略。

数据自动聚合自公共参考数据库（**PubChem**、**ECHA**、**NIST**等）。

科学引用 (10)

et al.. *Assessment of CPME as Sustainable Low VOC Alternative to Hexane: Optimization of Extraction Efficiency and Bioactive Compound Yield from Fenugreek Seed Oil Using Computational and Experimental Methods.*. (2024). DOI: 10.3390/foods13233899

et al.. *Confined growth of UiO-66 into ultrahigh-loading membranes for efficient hexane isomer separation.*. (2025). DOI: 10.1039/d5sc04212g

Api AM, Belsito D, Botelho D et al.. *RIFM fragrance ingredient safety assessment, n-hexane, CAS Registry Number 110-54-3.*. Food and chemical toxicology : an international journal published for the British Industrial Biological Research Association (2022). DOI: 10.1016/j.fct.2022.112973

WORKING DRAFT · 工作草案

et al.. *Comparative metabolic profiling, enzyme inhibitory activities, and in-silico analysis of the hexane extract and the hydrodistilled oil of Boswellia serrata.*. (2026). DOI: 10.1371/journal.pone.0348178

et al.. *Extraction of Phospholipids From Crude Rapeseed Oil by n-Hexane/Alcohol System: Effects of Solvent Composition on Extraction Performance and Oil Quality.*. (2026). DOI: 10.1002/fsn3.71866

H说明全文

H225	高度易燃液体和蒸气
H361f	怀疑对生育能力造成伤害
H304	吞咽并进入呼吸道可能致命
H336	可引起昏睡或眩晕
H372	长期或反复接触会对器官造成伤害(说明已知的所有受影响器官)(说明接触途径——如已确证无其他接触途径造成这一危害)
H315	造成皮肤刺激
H411	对水生生物有毒并具有长期持续影响

P说明全文

P201	使用前取得专用说明。
P202	在阅读并明了所有安全措施前切勿搬动。
P210	远离热源、热表面、火花、明火和其他点火源。禁止吸烟。
P233	保持容器密闭。
P240	货箱和装载设备接地并等势联接。
P260	不要吸入粉尘/烟/气体/气雾/蒸气/喷雾。
P264	作业后彻底清洗手部[和……]。
P271	只能在室外或充分通风的情况下使用。
P273	避免释放到环境中。
P280	戴防护手套/穿防护服/戴防护眼罩/戴防护面具/戴听力保护装置……
P301+P310	如误吞咽：：立即呼叫中毒急救中心/医生/……
P302+P352	如皮肤沾染：：用水充分清洗/……
P303+P361+P353	如皮肤(或头发)沾染：：立即脱掉所有沾染的衣服。；用水清洗患处【或淋浴】
P304+P340	如误吸入：：将人转移到空气新鲜处，保持呼吸舒适体位。
P308+P313	如已接触或有疑虑：：求医/就诊。
P312	如感觉不适，呼叫中毒急救中心/医生/……
P314	如感觉不适，须求医/就诊。
P331	不得诱导呕吐。
P332+P313	如发生皮肤刺激：：求医/就诊。
P370+P378	如起火：：使用……灭火。
P391	收集溢出物。
P403+P235	存放于通风良好处。：保持低温。
P403+P233	存放于通风良好处。：保持容器密闭。
P405	存放处须加锁。
P501	处置内装物/容器……

缩写

ADR	欧洲关于危险货物国际公路运输的协定
ATE	急性毒性估计
CAS号	Chemical Abstracts Service
CLP	分类、标签和包装（(EC) 1272/2008法规）
CMR	致癌性、致突变性、生殖毒性

WORKING DRAFT · 工作草稿

DNEL	衍生无效应水平
EC	European Community number
EPI	个人防护装备
GHS	全球统一制度
IATA	国际航空运输协会
IMDG	国际海运危险货物规则
安全数据表	安全数据表
LC50	半数致死浓度
LD50	半数致死剂量
NDS	最高容许浓度（工作场所，波兰）
NDSCh	短时 NDS
OEL	Occupational Exposure Limit
PBT	持久性、生物累积性和毒性
PNEC	预测无效应浓度
REACH	化学品注册、评估、许可和限制（(EC) 1907/2006法规）
SDS	Safety Data Sheet
STOT	特定靶器官毒性
SVHC	高度关注物质
TPSA	Topological Polar Surface Area
vPvB	高持久性和高生物累积性

版本历史

v8 (10.11.2026)	基于 ECHA 协调分类编制（CLP 附件 VI，ATP 23）。

参考文献

[1] 欧洲议会和理事会。法规(EC) 第1907/2006号 (REACH)。第31条，附件II。欧盟官方公报 L 396/2006。 URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2006/1907/oj Accessed: 2026-11-10.

[2] 欧盟委员会。法规(EU) 2020/878 — 修订REACH附件II。欧盟官方公报 L 203/2020。自01.01.2023起。 URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2020/878/oj Accessed: 2026-11-10.

[3] 欧洲议会和理事会。法规(EC) 1272/2008 (CLP) + ATP 23。欧盟官方公报 L 353/2008。 (2026-07-07) URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2008/1272/oj Accessed: 2026-11-10.

[4] United Nations. GHS Rev.9. ST/SG/AC.10/30/Rev.9. New York and Geneva: United Nations, 2021. URL: https://unece.org/transport/dangerous-goods/ghs-rev9-2021 Accessed: 2026-11-10.

[5] ISO. ISO 7010:2019 — Graphical symbols. Safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/72424.html Accessed: 2026-11-10.

[6] ISO. ISO 3864-1:2011 — Safety colours and safety signs. URL: https://www.iso.org/standard/51021.html Accessed: 2026-11-10.

[7] PubChem. National Center for Biotechnology Information (NIH/NLM), chemical compound database. URL: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/8058

[8] NIST. Chemistry WebBook, SRD 69. National Institute of Standards and Technology. URL: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=110-54-3

[9] Reid, R.C., Prausnitz, J.M., Poling, B.E. The Properties of Gases and Liquids. 4th ed. New York: McGraw-Hill, 1987.

[10] NIOSH. Registry of Toxic Effects of Chemical Substances (RTECS). Cincinnati: NIOSH. URL: https://www.cdc.gov/niosh/rtecs

[11] ECHA. REACH Registration Dossier (registered substance, acute toxicity study record). Helsinki: European Chemicals Agency. URL: https://echa.europa.eu/registration-dossier

[12] ECHA. European Chemicals Agency — harmonised classification inventory (CLP Annex VI). URL: https://echa.europa.eu

[13] UNECE. European Agreement concerning the International Carriage of Dangerous Goods by Road (ADR), 2025 edition (ECE/TRANS/352). Geneva: United Nations. URL: https://unece.org/adr

[14] European Commission. Decision 2000/532/EC establishing a list of wastes (European Waste Catalogue). OJ EU L 226/3. URL: https://eur-lex.europa.eu/eli/dec/2000/532/oj

[15] European Chemicals Agency (ECHA). Guidance on the Compilation of Safety Data Sheets. Version 4.0. Helsinki: European Chemicals Agency, 2020. URL: https://echa.europa.eu/documents/10162/2324906/sds_en.pdf

[16] Urben, P.G., ed. Bretherick's Handbook of Reactive Chemical Hazards. 8th ed. Oxford: Academic Press.

[17] Act of 26 June 1974 — Labour Code (Poland), Art. 176 § 1. Journal of Laws 2023 item 1465. URL: https://isap.sejm.gov.pl

[18] Council of Ministers of the Republic of Poland. Regulation of 3 April 2017 on the list of arduous, hazardous or health-harmful work for pregnant and breastfeeding women. Journal of Laws 2017 item 796. URL: https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20170000796

[19] CEN. Personal protective equipment standards (EN ISO 374-1, EN 166, EN 149, EN 14387, EN ISO 20345). Brussels: European Committee for Standardization.

[20] ECHA. Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment, Chapter R.11: PBT/vPvB Assessment. Helsinki: European Chemicals Agency. URL: https://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-information-requirements-and-chemical-safety-assessment

[21] European Parliament and Council. Regulation (EC) No 1907/2006 (REACH), Annex XIII — Criteria for the identification of PBT and vPvB substances. OJ EU L 396/2006 (consolidated). URL: https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX:02006R1907-20140410

WORKING DRAFT · 工作草案

[22] U.S. EPA. ECOTOX Knowledgebase. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency. URL: https://cfpub.epa.gov/ecotox/

[23] MOL-GOD. Value obtained by calculation from the molecular formula/molecular weight (the specific quantity and its formula are indicated at the respective field). Calculated value, not an experimental measurement. URL: https://www.nist.gov/pml/atomic-weights-and-isotopic-compositions-relative-atomic-masses

[24] DECHEMA, PTB, and BAM. CHEMSAFE - Database of Evaluated Safety Characteristics for the Avoidance of Explosions. Frankfurt am Main: DECHEMA e.V.; Braunschweig/Berlin: Physikalisch-Technische Bundesanstalt and Bundesanstalt fur Materialforschung und -prufung. URL: https://www.chemsafe.ptb.de

[25] Sangster, J. "Octanol-Water Partition Coefficients of Simple Organic Compounds." Journal of Physical and Chemical Reference Data 18, no. 3 (1989): 1111-1229. URL: https://doi.org/10.1063/1.555833

[26] MRiPS 2018年6月12日条例 — NDS/NDN。法律公报 2024 第1017项。 URL: https://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20240001017 Accessed: 2026-11-10.

外部链接

NIST: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=110-54-3

ChEMBL: https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound_report_card/CHEMBL15939

NFPA 704 （补充信息——NFPA/美国系统；不是REACH附件II要求的欧盟安全数据表要素）



法律声明： 本文件根据 PubChem (NIH)、ECHA、NIST WebBook、ChemSpider (RSC) 及其他公共数据库的数据自动生成。本文件不能替代符合法规 (EC) No 1907/2006 (REACH) 的正式安全数据表 (SDS)。使用该物质前，请对照制造商现行的安全数据表核实数据。
生成器： 本文件根据 ECHA 协调分类（CLP 附件 VI）和公共理化数据库自动生成。
作者： **www.MolGod.org** — 自动化安全数据表 (SDS) 平台。
发布日期： 10.11.2026 | 文件版本： 8

WORKING DRAFT 工作草稿